6Д

УДК 004.272.2:519.63

О.А. Дмитриева
Донецкий национальный технический университет, Украина
Украина, 83000, г. Донецк, ул. Артема, 58

Параллельный контроль размера шага на основе коллокационных методов с использованием интерполяционных полиномов Эрмита

O.A. Dmitrieva
Donetsk National Technical University, Ukraine
Ukraine, 83000, c. Donetsk, st. Artema,58

Parallel Step Control on the Basis of Collocation Methods with use of Interpolation Polynoms of Hermite

О.А. Дмитрієва
Донецький національний технічний університет, Україна
Україна, 83000, м. Донецьк, вул. Артема, 58

Паралельний контроль розміру кроку на основі колокаційних методів з використанням інтерполяційних поліномів Ерміта

Работа посвящена построению параллельных алгоритмов управления шагом интегрирования при решении задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Алгоритмы строятся на многошаговых коллокационных блочных методах со старшими производными, что обеспечивает векторизацию процедуры получения решения. Для выравнивания порядка аппроксимации во всех расчетных точках блока используются многочлены Эрмита.
Ключевые слова: задача Коши, паралелльные вычисления, коллокация, многочлены Эрмита.

Work is devoted to creation of parallel algorithms of integration step variable with the Cauchy problem for systems of the ordinary differential equations. Algorithms are under construction on multistep collocation blocks methods with the senior derivatives that provides vectorization of procedure of obtaining the decision. For alignment of an order of approximation in all settlement points of the block Hermite's polynomials are used.
Key words: Cauchy problem, parallel computing, collocation, Hermite's polynomials.

Робота присвячена побудові паралельних алгоритмів управління кроком інтегрування при розв'язанні задачі Коші для систем звичайних диференціальних рівнянь. Алгоритми будуються на багатокрокових колокаційних блокових методах зі старшими похідними, що забезпечує векторизацію процедури одержання розв'язку. Для вирівнювання порядку апроксимації у всіх розрахункових точках блоку використовуються багаточлени Ерміта.
Ключові слова: задача Коші, паралельні обчислення, колокація, багаточлени Эрміта.

При численном моделировании сложных динамических объектов, описываемых системами обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ), необходимы вычислительные мощности такого порядка, который может быть обеспечен только многопроцессорными компьютерами [1], [2]. При этом для эффективной параллельной реализации требуется построение соответствующих численных методов, поскольку подавляющее большинство существующих методов не ориентировано на параллельную архитектуру [3]. Еще одной проблемой является жесткость СОДУ и необходимость проведения

вычислений на очень большом интервале времени. В таких случаях для численного интегрирования привлекаются расчетные схемы с хорошими свойствами устойчивости, сходимости и со встроенными функциями управления шагом [4]. Данная статья является продолжением работ [5-8] и базируется на идее построения коллокационных блочных методов, которые обеспечивают векторизацию процедуры получения решения задачи Коши

$$x' = f(t,x(t)), \quad x(t_0) = x_0, t \in [t_0,T]. \qquad (1)$$

Повышение скорости сходимости осуществляется за счет введения вместо интерполяционных многочленов Лагранжа многочленов с кратными узлами, для которых требуется совпадения в точках коллокации $t_n + i\tau$ не только значений функции $f(t,x(t))$, но и ее производных $f^{(j)}(t,x(t)), j = 1,2,...,p_i$ до порядка p_i включительно [7]. В качестве многочлена с кратными узлами предполагается использование полинома Эрмита, который может быть построен в виде рекуррентных соотношений, или получен путем предельного перехода из многочленов Лагранжа и Ньютона [9].

Для параллельной реализации выбирается блочный метод, тип которого определяется количеством используемых опорных точек. Если в расчетной схеме для вычислений приближенных значений в следующем блоке используется только значение в последней точке предшествующего блока, можно говорить об одношаговом коллокационном блочном методе

$$u_{n,j} = u_{n,0} + \tau \sum_{i=1}^{s} \tau^l a_{i,j}^{(l)} F_{n,i}^{(l)}, \; j=1,2,...,s, \qquad (2)$$

где $F_{n,i}^{(l)} = f^{(l)}(t_n + i\tau, u_{n,i})$ l-я производная правой части,

$a_{i,j}^{(l)}$ – коэффициенты расчетной схемы, которые находятся из соотношений

$$a_{i,j}^{(l)} = \int_0^{i\tau} h_{j,l}(t)dt, \quad i,j = 1,2,...,s,$$

где $h_{j,l}$ – соответствующие многочлены Эрмита.

При использовании всех или нескольких значений в точках предшествующего блока речь будет идти о многошаговом коллокационном блочном методе вида

$$u_{n,j} = u_{n,0} + \tau \sum_{i=1}^{m} b_{i,j} F_{n-1,i}^{(0)} + \tau \sum_{l=0}^{p_j} \sum_{i=1}^{s} \tau^l a_{i,j}^{(l)} F_{n,i}^{(l)}, \quad j=1,2,...,s, \quad n = 1,2,...,N, \qquad (3)$$

где p_j – старший порядок введенной производной правой части в точке $t_n + j\tau$.

Модификация разностных схем (3), описанная в [10], связана с введением повышенного порядка производных в опорных точках, что позволяет повысить порядок аппроксимации разностных схем и не приводит к росту размерности системы. Тогда модифицированные уравнения многошаговых разностных методов для блока из s точек при использовании вычисленных значений приближенного решения в m предшествующих блоку узлах, с учетом введенных выше обозначений, можно записать

$$u_{n,j} = u_{n,0} + \tau \sum_{i=1}^{m} \sum_{l=0}^{q_i} \tau^l b_{i,j}^{(l)} F_{n-1,i}^{(l)} + \tau \sum_{l=0}^{p_j} \sum_{i=1}^{s} \tau^l a_{i,j}^{(l)} F_{n,i}^{(l)}, \quad j=1,2,...,s, \quad n = 1,2,...,N. \qquad (4)$$

Поскольку все значения правых частей опорного блока $F_{n-1,i}^{(0)}$ уже известны, можно определять их старшие производные $F_{n-1,i}^{(l)} = f^{(l)}, l = 1,2,...,q_i, i = 1,2,...,m$, не увеличивая количество уравнений в системе.

Формулы (4) определяют блочный коллокационный m-шаговый s-точечный разностный метод со старшими производными правых частей в расчетных и опорных точках блока. При этом $T_n^s = \{t_{n,1}, t_{n,2}, ..., t_{n,s}\}$ – множество точек, в которых значения определяются одновременно. В качестве исходных методов в работе рассматриваются вычислительные схемы (2 – 4) для блоков, содержащих s узлов, при использовании вычисленных значений приближенного решения в одном (2) или m (3 – 4) предшествующих блоку узлах.

Для численного решения задачи (1) одношаговым коллокационным блочным методом (2) с числом расчетных точек s выделяются две системы процессорных узлов, на которых запускаются параллельные процессы. Первая система узлов обеспечивает параллельную реализацию одношагового коллокационного блочного s-точечного метода, для чего требуется s процессоров для получения значений $u_{n+1,i}$, $i = 1,2,...,s.$ На второй системе узлов осуществляется реализация одношагового коллокационного блочного $s+1$-точечного метода с получением значений. Размерность вычислительного поля представляется двумя вариантами. В первом случае – это две закольцованные линейки, количество процессоров в которых совпадает с размерностью блоков s и $s+1$ соответственно, во втором случае – вычислительные поля представляются решетками процессоров. Первая решетка с s (количество точек в блоке) столбцами и N (количество уравнений в системе) строками, у второй решетки размерность процессорного поля. Для осуществления итераций по (2) в каждом i-м процессоре, обеспечивающем вычисления s точечным методом, размещаются соответствующие коэффициенты $a_{i,j}, b_i,\ i = 1,2,..,s+1, j = 1,2,...,s+1$, а также значения элементов вектора правых частей системы в последней точке предшествующего блока, которые будут считаться начальными для следующего. Для группы процессоров элементов, которые обеспечивают решение $s+1$ точечным методом, соответствующие коэффициенты $a_{i,j}, b_i,\ i = 1,2,...,s+1,\ j = 1,2,...,s+1$. Дополнительно на каждой итерации рассчитываются значения производных правых частей $F_{n,i}^{(l)} = f^{(l)}, l = 1,2,...,q_i, i = 1,2,...,s+1$. Параллельное управление шагом для задачи (1) многошаговым коллокационным блочным методом с производными старших порядков (3) с числом опорных точек m и расчетных s не будет иметь принципиальных различий с рассмотренными в [11] подходами. Однако возникает необходимость в формировании начальных данных для расчета очередного блока значений. В зависимости от значения нормы вектора расхождений, будет изменяться расчетная схема определения шага интегрирования. Если норма вектора расхождений не превосходит заданную глобальную точность вычислений $\|u_{i,i} - v_{i,i}\| \le tol, i = 1,2,...,s$, за основу берется решение, полученное коллокационным блочным $s+1$-точечным методом $v_{n+1,i}$, i=1,2,.,s+1. Рассчитывается новое значение шага τ_{new}

$$\tau_{new} = \tau_{n+1} \min\left(fax\max, \max\left(fax\min, \omega\left(\frac{\varepsilon}{\|u_{i,i} - v_{i,i}\|} \right)^{\frac{1}{q}} \right)\right) \tag{5}$$

и по результатам расчета $s+1$-точечным m-шаговым методом формируется новый вектор опорных точек. Если норма вектора расхождений не превосходит заданную локальную точность вычислений, т.е. $tol < \|u_{i,i} - v_{i,i}\| \le \varepsilon, i = 1,2,...,s$, за основу берется решение, полученное коллокационным блочным s-точечным методом $u_{n+1,i}$, $i = 1,2,...,s.$, Рассчитывается новое значение шага τ_{new}, и новый вектор опорных точек формируется

по результатам расчета *s*-точечным методом. Если полученное решение не обеспечивает заданную локальную точность, от шага необходимо отказаться, сократив его на величину, задаваемую параметром *faxmin.* В качестве максимальных коэффициентов увеличения шага *facmax и* уменьшения *faxmin*, параметра ω, а также начальной длины шага могут быть приняты значения, описанные в [5].

Для выявления рабочих характеристик и областей применимости, разработанных коллокационных методов со старшими производными, рассматривалась численная реализация известных тестовых задач: жестких, плохо обусловленных, быстроосциллирующих, жесткоосциллирующих и т.п. Одним из таких тестов является система обыкновенных дифференциальных уравнений вида

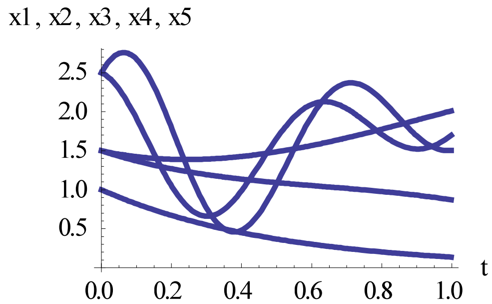
$$x_1{}' = \mu_0 x_1, \quad x_2{}' = (\mu_0 - \mu_1)x_1 + (\mu_1 + \nu_1)x_2 - \nu_1 x_3, \qquad (6)$$

$$x_3{}' = (\mu_0 - \mu_1 - \nu_1)x_1 + 2\nu_1 x_2 + (\mu_1 - \nu_1)x_3,$$

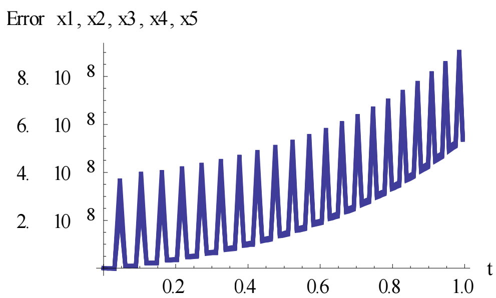
$$x_4{}' = (\mu_0 - \mu_1 - \nu_1)x_1 + 2\nu_1 x_2 + (\mu_1 - \nu_1 - \mu_2)x_3 + (\mu_2 + \nu_2)x_4 - \nu_2 x_5,$$

$$x_5{}' = (\mu_0 - \mu_1 - \nu_1)x_1 + 2\nu_1 x_2 + (\mu_1 - \nu_1 - \mu_2 - \nu_2)x_3 + 2\nu_2 x_4 + (\mu_2 - \nu_2)x_5,$$

приведенная в [12].



а)



б)

Рисунок 1 – Поведение численного решения а) и распределения глобальных погрешностей б) задачи (6 – 8)

Если выполнены условия $x_2(0) = x_3(0), \quad x_4(0) = x_5(0)$, то точное решение этой системы на интервале $t \in [0,1]$ имеет вид

$$x_1(t) = x_1(0)e^{\mu_0 t}, \quad x_2(t) = x_1(t) + (x_2(0) - x_1(0))e^{\mu_1 t}\cos(\nu_1 t),$$

$$x_3(t) = x_1(t) + \sqrt{2}(x_2(0) - x_1(0))e^{\mu_1 t}\sin(\nu_1(t + \pi/4)),$$

$$x_4(t) = x_3(t) + (x_4(0) - x_2(0))e^{\mu_2 t}\cos(\nu_2 t),$$

$$x_5(t) = x_3(t) + \sqrt{2}(x_4(0) - x_2(0))e^{\mu_2 t}\sin(\nu_2(t + \pi/4)).$$

Задача (5) может быть хорошо обусловленной и нежесткой при начальных условиях

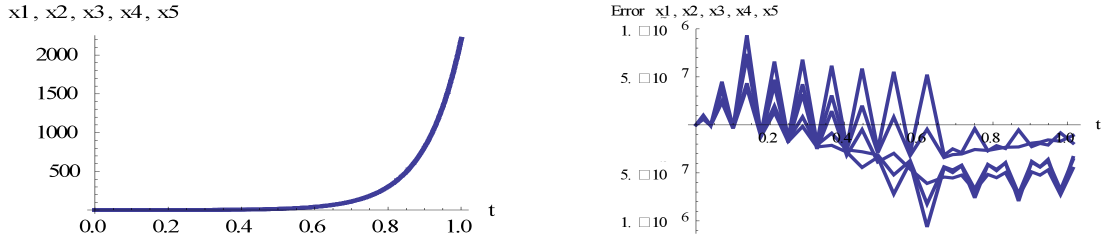
$$x_1(0) = 1, x_2(0) = x_3(0) = 1.5, x_4(0) = x_5(0) = 2.5 \qquad (7)$$

и со следующими значениями параметров

$$\mu_0 = -2, \mu_1 = 1, \mu_2 = 1, \nu_1 = -1, \nu_2 = 10. \qquad (8)$$

Даже для нежесткого варианта задачи (6) с начальными условиями (7) и с параметрами (8) при численном решении коллокационными методами с заданной точностью имеет место преимущество по времени получения решения. Это объясняется тем, что число просчетов сокращается пропорционально размерности

блока. На рис. 1 показано поведение численного решения и распределения глобальных погрешностей при заданной точности 10^{-6}. Задача (6) плохо обусловлена (рис.2) при начальных условиях [12]



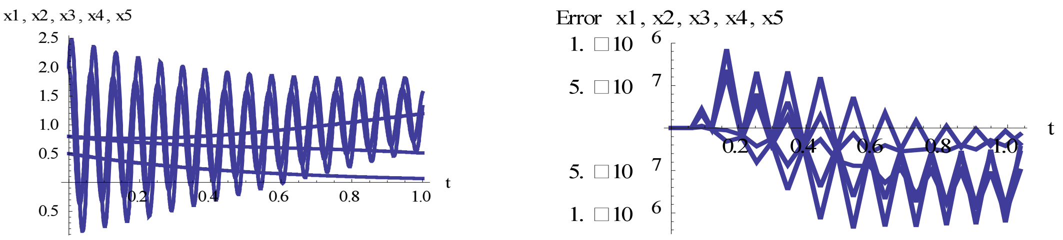
а) б)

Рисунок 2 – Поведение численного решения а) и распределения глобальных погрешностей б) задачи (6, 9 – 10)

$$x_1(0) = 0.1,\ x_2(0) = x_3(0) = 1,\ x_4(0) = x_5(0) = 0.5 \quad (9)$$

с параметрами

$$\mu_0 = -2,\ \mu_1 = 1,\ \mu_2 = 1,\ \nu_1 = -1,\ \nu_2 = 10. \quad (10)$$



а) б)

Рисунок 3 – Поведение численного решения а) и распределения глобальных погрешностей б) задачи (6, 11 – 12)

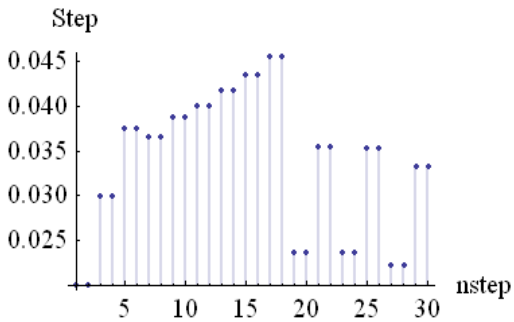


Рисунок 4 – Вариация шага для задачи (6 – 8)

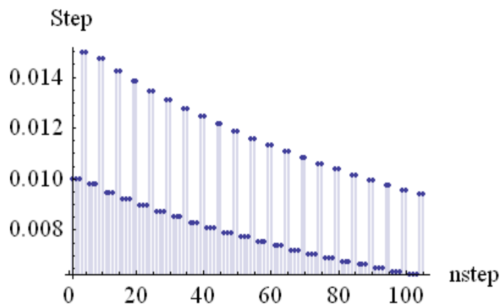


Рисунок 5 – Вариация шага для задачи (6, 9 –10)

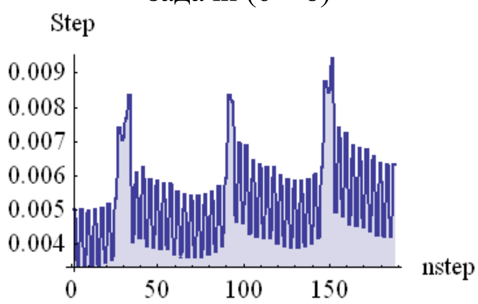


Рисунок 6 – Вариация шага для задачи (6, 11-12)

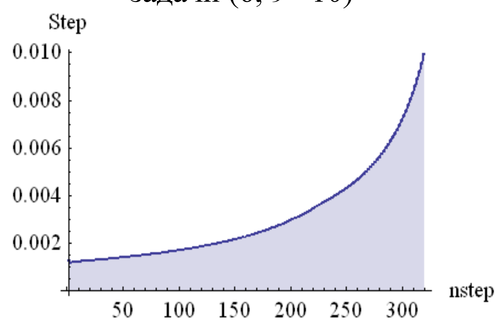


Рисунок 7 – Вариация шага для задачи (6, 13 – 14)

Задача (6) быстроосциллирующая при начальных условиях [12]

$$x_1(0) = 0.5,\ x_2(0) = x_3(0) = 0.8,\ x_4(0) = x_5(0) = 2 \tag{11}$$

с параметрами

$$\mu_0 = -2,\ \mu_1 = 1,\ \mu_2 = 1,\ \nu_1 = -1,\ \nu_2 = 1000. \tag{12}$$

Поведение численного решения и распределения глобальных погрешностей для задачи (6, 11 – 12) при заданной точности 10^{-6} показано на рис. 3. Задача (6), жесткая при начальных условиях

$$x_1(0) = 10,\ x_2(0) = x_3(0) = 11,\ x_4(0) = x_5(0) = 111 \tag{13}$$

с параметрами

$$\mu_0 = -100,\ \mu_1 = -1,\ \mu_2 = 1,\ \nu_1 = -10000,\ \nu_2 = 10. \tag{14}$$

Вариация длины шага по каждому из рассмотренных вариантов приведена на рис. 4 – 7.

Построение процедуры управления шагом на коллокационных блочных методах со старшими производными позволяет продвигаться сразу на s или на $s+1$ расчетную точку в зависимости от нормированных величин расхождений, полученных при формировании очередного блока, что обеспечивает соответствующую величину ускорения даже при последовательной реализации. Введение дополнительных производных позволило значительно повысить порядок аппроксимации, не прибегая к наращиванию размерности системы, как это происходит при использовании многостадийных методов. На известных тестовых задачах выполнена параллельная реализация всех предложенных в разделе алгоритмов управления шагом. В качестве размера шага выбирался максимально возможный, обеспечивающий с учетом гарантийных факторов локальную точность. Полученные характеристики параллелизма свидетельствуют о высоких скоростных свойствах разработанных методов.

Литература

1. Dmitrieva O. Parallel Algorithms of Simulation. Increase of simulation of dynamic objects with the lumped parameters into parallel computer systems / O. Dmitrieva, A. Firsova. – Lambert Academic Publishing, 2012. – 192 p. – ISBN-13: 978-3-659-28540-0, ISBN-10: 3659285404.
2. Zanariah A.M. Solving Large Systems of Ordinary Differential Equations on Parallel Computer / A.M. Zanariah, M.B. Suleiman // Journ. of Scientific Research. –2009. – Vol. 29, № 4. – P. 491-501.
3. Embedded block parallel methods for initial Cauchy problem numerical solution / [Feldman L.P., Nazarova I.A., Dmitrieva O.A., Mikhaylova T.V.] // Proceedings of DNTU. – 2010. – № 1. – P. 12-17.
4. Soderlind G. Digital filters in adaptive time-stepping / G. Soderlind // ACM Trans. Math. Softwar. - 2003. – Vol. 29. – P. 1-26
5. Dmitrieva O. Parallel Step Control. Development of parallel algorithms of the step variation for simulation of stiff dynamic systems/ O. Dmitrieva, L. Feldman. – Lambert Academic Publishing, 2013. – 72 p. – ISBN-13: 978-3-659-38425-7, ISBN-10: 3659384259.
6. Firsova A. Dynamic System Simulation. Robust algorithms of state estimation of dynamic lumped parameters systems / A. Firsova, O. Dmitrieva. – Lambert Academic Publishing, 2011. – 92 p.
7. Дмитриева О.А. Высокоэффективные алгоритмы управления шагом на основе параллельных коллокационных блочных методов / О.А. Дмитриева // Искусственный интеллект. – 2012. – № 4. – С. 77–88.
8. Дмитриева О.А Параллельное моделирование динамических объектов с автоматическим выбором шага на основе экстраполяционных методов / О.А. Дмитриева // Радіоелектронні і комп'ютерні системи. – 2012. – № 6 (58). – С. 312-317.
9. Хайрер Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие задачи / Г. Ваннер. - М. : Мир, 1999. – 685 с.
10. Дмитриева О.А Разработка многошаговых параллельных коллокационных блочных методов с использованием интерполяционных полиномов Эрмита / О.А. Дмитриева // Радіоелектронні і комп'ютерні системи. – 2013. – № 5 (64). – Харків : НАУ ім. Жуковського «Харківський авіаційний інститут». – 2013. – С. 243-249.

11. Дмитрієва О.А. Генерація стійких блокових методів для розв'язання жорстких диференційних рівнянь і їх систем / О.А. Дмитрієва // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка» (ІКОТ-2011). Випуск 14(188). – Донецьк : ДонНТУ. – 2011. – С. 36-43.
12. Арушанян О.Б. Тесты для вычислительного практикума по обыкновенным дифференциальным уравнениям / О.Б. Арушанян, С.Ф. Залеткин, Н.Н. Калиткин // Вычислительные методы и программирование. – 2002. – Т. 3. – С. 11-19.

Literatura

1. Dmitrieva O., Firsova A. Parallel Algorithms of Simulation. Increase of simulation of dynamic objects with the lumped pa rameters into parallel computer systems. – Lambert Academic Publishing, 2012. – 192 p.
2. Zanariah A. M., Suleiman M.B. Solving Large Systems of Ordinary Differential Equations on Parallel Computer // Journ. of Scientific Research. – 2009. – Vol. 29, № 4. – P. 491-501.
3. Feldman L., Nazarova I., Dmitrieva O., Mikhaylova T. Proceedings of DNTU. – 2010. – № 1. – P. 12-17.
4. Soderlind G. Digital filters in adaptive time-stepping // ACM Trans. Math. Soft. – 2003. – Vol. 29. – P. 1-26.
5. Dmitrieva O., Feldman L. Parallel Step Control. Development of parallel algorithms of the step variation for simulation of stiff dynamic systems. – Lambert Academic Publishing, 2013. – 72 p.
6. Firsova A, Dmitrieva O. Dynamic System Simulation. Robust algorithms of state estimation of dynamic lumped parameters systems. – Lambert Academic Publishing, 2011. – 92 p.
7. Dmitrieva O.A. Iskusstvennyj intellect. – 2012. – № 4. – S. 77-88.
8. Dmitrieva O.A. Radioelektronnye komp'yuternye systemy. – 2012. – № 6 (58). – S. 312-317.
9. Hayrer E., Wanner. G. Solution of ordinary differential equations. Tough task. – Springer-Verlag, 1999. – 685s.
10. Dmitrieva O. A. Radioelektronnye komp'yuternye systemy. – 2013. – № 5 (64). – S. 243-249.
11. Dmitrieva O. A. IKOT. – 2011. – № 14 (188). – S. 36-43.
12. Arushanjan O.B., Zaljotkin S.F., Kalitkin N.N. Vychislitelnye metody I programmirovaniye. – 2002. – № 3. – S. 11-19.

RESUME

O.A. Dmitrieva

Parallel Step Control on the Basis of Collocation Methods with use of Interpolation Polynoms of Hermite

The paper concerns itself of parallel step control with the numerical realization of the Cauchy problem for ordinary differential equations and their systems in parallel computer systems. The block collocation methods are developed that allow us to find a solution simultaneously in all the calculating points of the block, which reduces the time of obtaining the solution even for the sequential implementation. In order to align the order of approximation in all the calculating points of the block the additional higher-order derivatives are introduced into the difference schemes. Interpolation polynomials Hermite with multiple nodes are constructed in the form of recurrence relations or are obtained by taking the limiting process of the Lagrange and Newton polynomials. The introduction of the additional derivatives does not increase the dimension of the system, so the computational cost is the same as in the case of solving by the stage collocation methods or their corresponding implicit methods. On the basis of the proposed algorithms of step size control the test problems were implemented, the numerical solution of which provides the required accuracy with the maximum possible integration step.

Статья поступила в редакцию 10.06.2013.